

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

VIŠJE RAČUNSKÉ METODE
9. naloga: Metode DMRG

Žiga Šinigoj, 28222025

Ljubljana, junij 2023

1 Uvod

V nalogi nas bo zanimalo osnovno stanje Heisenbergove antiferomagnetne verige spinov, spinske korelacije in časovni razvoj Heisenbergove feromagnetne domenske stene. Za propagacijo sistemov v realnem ali imaginarnem času uporabimo TEBD algoritem. Ker imamo opravka z lokalnim Hamiltonianom se delovanje propagatorja na stanje precej poenostavi, postopek je sledeč

Vzemimo lokalni Hamiltonian

$$H = \sum_j^{n-1} h_{j,j+1} \quad (1)$$

Propagator $U(z) = e^{zH}$ v Suzuki-Trotterjevi shemi predstavimo izmenoma kot produkt sodih in lihih dvodelčnih propagatorjev

$$U(z) = \left(\prod_{k=1}^{n/2} U_{2k-1,2k}(z/m) \prod_{j=1}^{(n-1)/2} U_{2j,2j+1}(z/m) \right)^m. \quad (2)$$

V nalogi sem uporabljal simetrizirano shemo $S_2(z)$. Operator $U_{j,j+1}(z)$ je oblike

$$U_{j,j+1}(z) = e^{zh_{j,j+1}} = \mathbb{1}_{2^{j-1}} \otimes U(z)^{(2)} \otimes \mathbb{1}_{2^{n-j-1}}, \quad (3)$$

kjer $U(z)^{(2)}$ deluje samo na dveh spinih in je za Heisenbergov antiferomagnetni Hamiltonian oblike

$$U(z)^{(2)} = e^z \begin{pmatrix} e^{-2z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (2z) & -(2z) & 0 \\ 0 & -(2z) & (2z) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-2z} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Za propagacijo sistema je potrebno vedeti, kako deluje dvodelčni operator $U_{j,j+1}$ na večdelčno stanje

$$|\psi'\rangle = U_{j,j+1}|\psi\rangle. \quad (5)$$

Stanje zapišemo v kanonični Schmidtovi obliki

$$\psi_{s_1, \dots, s_n} = B_{s_1}^{(1)} \lambda^{(1)} \dots \lambda^{(n-1)} B_{s_n}^{(n)}, \quad (6)$$

in aplikacija dvodelčnega operatorja $U_{j,j+1}$ nam da

$$\psi'_{s_1, \dots, s_n} = B_{s_1}^{(1)} \lambda^{(1)} \dots \lambda^{(j-1)} B_{s_j, s_{j+1}}^{(j,j+1)} \lambda^{(j+1)} \dots \lambda^{(n-1)} B_{s_n}^{(n)}, \quad (7)$$

kjer je

$$B_{s_j, s_{j+1}}^{(j,j+1)} = \sum_{s'_j, s'_{j+1}} U_{(s_j, s_{j+1}), (s'_j, s'_{j+1})}^{(2)} B_{s'_j}^{(j)} \lambda^{(j)} B_{s'_{j+1}}^{(j+1)}. \quad (8)$$

Definirajmo matriko Q in naredimo SVD razcep

$$Q_{(k_{j-1}, s_j), (k_{j+1}, s_{j+1})} = \lambda_{k_{j-1}}^{(j-1)} \left(B_{(s_j, s_{j+1})}^{(j,j+1)} \right)_{k_{j-1}, k_{j+1}} \lambda_{k_{j+1}}^{(j+1)} \quad (9)$$

$$Q = UDV^\dagger \quad (10)$$

Razcep ima M neničelnih singularnih vrednosti, ki je lahko večji maksimalne dimenzije MPA na mestu j - M_j z indeksi k_j . Če je večji, potem zavržemo vse najmanjše singularne vrednosti, za katere velja $k_j > M_j$. Sedaj definiramo nove lokalne MPA matrike na mestih $j, j+1$ kot

$$(B_{s_j}^{(j)'})_{k_{j-1}, k_j} = (\lambda_{k_{j-1}}^{(j-1)})^{-1} U_{(k_{j-1}, s_j), k_j} \quad (11)$$

$$\lambda_{k_j}^{(j)'} = D_{k_j, k_j} \quad (12)$$

$$(B_{s_{j+1}}^{(j+1)'})_{k_j, k_{j+1}} = V_{k_j, (k_{j+1}, s_{j+1})}^\dagger (\lambda_{k_{j+1}}^{(j+1)})^{-1}. \quad (13)$$

Tako imamo kanonično MPA obliko propagirane mnogodelčne valovne funkcije

$$\psi'_{s_1, \dots, s_n} = B_{s_1}^{(1)'} \lambda^{(1)'} \dots \lambda^{(n-1)'} B_{s_n}^{(n)'}, \quad (14)$$

kjer velja $B_{s_k}^{(k)'} = B_{s_k}^{(k)}$, $k \neq j, j+1$ in $\lambda^{(k)'} = \lambda^{(k)}$, $k \neq j$. Dobili smo algoritem za propagacijo v realnem času $z = it$ ali pa v imaginarnem času (za generiranje termalnih ravnovesnih stanj) $z = -\beta$. Uporabna bo tudi povezava med matrikami A in B

$$B_{s_1}^{(1)} = A_{s_1}^{(1)} \quad (15)$$

$$B_{s_j}^{(j)} = [\lambda^{(j-1)}]^{-1} A_{s_j}^{(j)}, j = 2, \dots, n. \quad (16)$$

Skalarni produkt dveh mnogodelčnih stanj v MPA obliki je definiran kot

$$\langle \phi | \psi \rangle = L T^{(2)} T^{(3)} \dots T^{(n-1)} R, \quad (17)$$

kjer je

$$T^{(j)} = \sum_{s=0}^{d-1} \tilde{A}_s^{(j)} \otimes A_s^{(j)}, j = 2, \dots, n-1 \quad (18)$$

$$L_{(k,l)} = \tilde{A}_k^{(1)} A_l^{(1)} \quad (19)$$

$$R_{(k,l)} = \tilde{A}_k^{(n)} A_l^{(n)} \quad (20)$$

$$\cdot \quad (21)$$

Ta način izračuna ni računsko najbolj optimalen $\mathcal{O}(nM^4)$, vendar je zelo nazoren. Izraz za skalarni produkt lahko posplošimo na računanje matričnih elementov lokalnih enodelčnih operatorjev O_j . Prehodno matriko T^j nadomestimo z

$$V_{(k,l),(k',l')}^{(j)} = \sum_{s,s'=0}^{d-1} O_{s,s'} (\tilde{A}_s^{(j)})_{k,k'} (A_{s'}^{(j)})_{l,l'} \quad (22)$$

in izračunamo matrični element kot

$$\langle \phi | O_j | \psi \rangle = L T^{(2)} \dots T^{(j-1)} V^{(j)} T^{(j+1)} \dots T^{(n-1)} R \quad (23)$$

Podobno posplošimo za dvodelčni operator

$$\langle \phi | O_j O_k | \psi \rangle = L T^{(2)} \dots T^{(j-1)} V^{(j)} T^{(j+1)} \dots T^{(k-1)} V^{(k)} T^{(k+1)} \dots T^{(n-1)} R \quad (24)$$

2 Rezultati

Računski del naloge sem opravil v C++, grafe pa v Pythonu. Za izračun matričnih elementov sem uporabil formulo 23, kar pa se je izkazalo za ne tako optimalno, saj je časovno potratna, sploh pri večjih sistemih ≈ 100 spinov. Naključno MPS stanje sem sestavil iz množice matrik, kateri elementi so naključna kompleksna števila q iz območja $q : -1 \leq \text{Re}(q) \leq 1, -1 \leq \text{Im}(q) \leq 1$. Prednost zapisa v MPS obliki je zmožnost predstavitve stanja 2^N bitov, za $N > 20$ v računalniškem spominu. Na primer, za vektor 2^{100} koeficientov ni prostora, vendar 100 matrik velikosti 50x50 ali 100x100 pa ni problematično shraniti v računalnik. Edina pomankljivost MPS zapisa je normalizacija oz. vsaj jaz nisem našel (analitičnega) načina da bi normaliziral matrike tako, da bi njihov produkt bil 1. Numerično bi lahko to dosegel iterativno, vendar sem potem kar delal z nenormiranimi stanji. Če ni posebej označeno, so vsi rezultati izračunani s TEBD algoritmom.

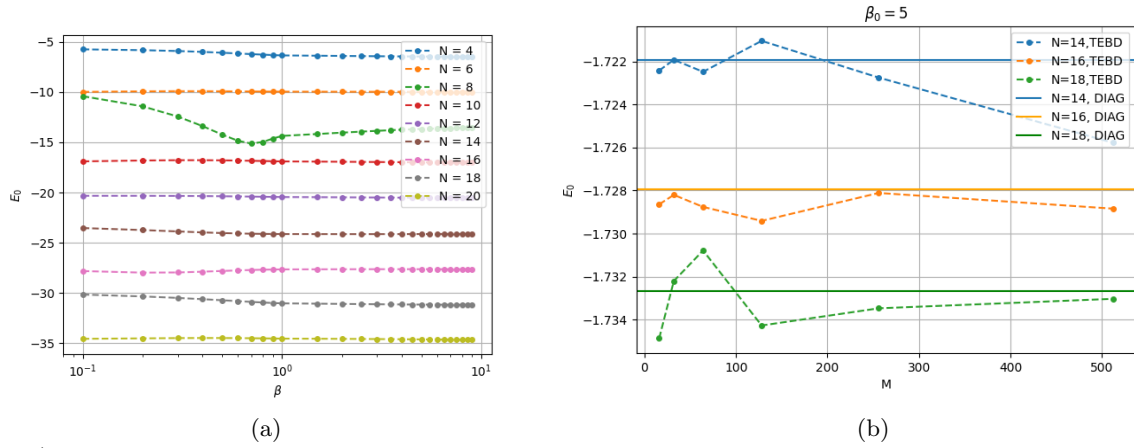
2.1 Osnovno stanje AFM

Pri iskanju osnovnega stanja Heisenbergove antiferomagnetne verige spinov sem začel z naključnim stanjem $|\psi_i\rangle$ v MPA obliki. Nanj delujemo s propagatorjem v imaginarnem času $e^{-\beta H} |\psi_i\rangle$. Energijo osnovnega stanja sem dobil preko prilagajanja premice po enačbi

$$\beta E_0 = -\log \left(\frac{\langle \underline{s} | e^{-\beta H} |\psi_i\rangle}{\langle \underline{s} | \psi_i \rangle} \right), \quad (25)$$

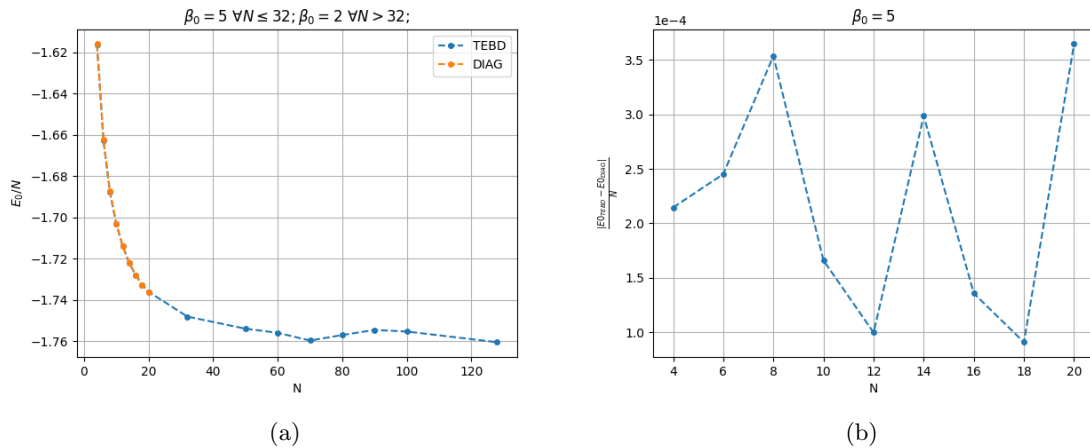
kjer naklon premice podaja E_0 in $|\underline{s}\rangle$ predstavlja poljubno mnogodelčno komponento. Načeloma bi lahko naredil skalarni produkt med začetnim stanjem in propagiranim stanjem, vendar je to časovno zamudno, sploh pri velikih sistemih, saj je množenje matrik reda $\mathcal{O}(M^3)$. Dobro oceno za energijo osnovnega stanja sem dobil če sem sesedal stanje $e^{-\beta H} |\psi_i\rangle$ z Neelovim stanjem oz. komponento $\langle \underline{s}_N |$. Na ta način sem se izognil skalarnemu produktu, ki mi lahko onemogoča izračun osnovnih energij za velike sisteme > 100 spinov. Za korak v imaginarnem času sem vzel $d\beta = 0.1$ in energijo pri dani $\beta = \beta_0$ sem dobil tako, da sem fital premico na 10 enakomerno porazdeljenih vrednosti na intervalu $[\beta_0, \beta_0 + 10 d\beta_{fit}]$, kjer je $d\beta_{fit} = 0.01$. Za manjše število spinov $N \leq 20$ lahko energijo osnovnega stanja dobim z diagonalizacijo Hamiltoniana, kar je bila tudi ena od prejšnjih nalog. Energijo v odvisnosti od inverzne temperature prikazuje slika (1a). Vse verige, razen $N=8$, dosežejo osnovno energijo že pri $\beta \approx 1$.

Zanimala me je odvisnost energije osnovnega stanja od maksimalne velikosti matrike M v MPS zapisu stanja (slika 1b). Presenetljivo, velikost ne veliko vpliva na energijo osnovnega stanja. Na primer, za $N=14$, je maksimalna velikost matrike v MPS 128×128 , ampak že reprezentacija z $M=32$, da dobro oceno za energijo osnovnega stanja. Za $M' > 128$ velja $M' = M$. Kljub temu pa sem dobil različne energije, kar je posledica različnih naključnih začetnih stanj. Bolje bi bilo, če bi imel enako seme za izračun, v tem primeru bi bile energije osnovnega stanja za $M \geq 128$ enake. Večinoma so fluktuacije v energiji posledica različnih začetnih stanj. MPS reprezentacija večdelčnega stanja in algoritem TEBD nam omogočata izračun energije



Slika 1: a) Energija osnovnega stanja AFM verige v odvisnosti od inverzne temperature za različne velikosti verig. b) Energija osnovnega stanja v odvisnosti od maksimalne velikosti matrike M v MPS. Horizontalne črte predstavljajo energijo osnovnega stanja, pridobljeno z diagonalizacijo Hamiltoniana.

osnovnega stanja AFM za veliko večje število spinov kot diagonalizacija Hamiltoniana (slika 2a). Odstopanja med TEBD in diagonalizacijo pa so relativno majhna v področju dolžin verig, kjer ju lahko primerjamo (slika 2b).



Slika 2: a) Energija osnovnega stanja na spin v odvisnosti od velikosti verige spinov N . b) Energijska razlika na spin, med energijo osnovnega stanja pridobljeno z diagonalizacijo in TEBD algoritmom, v odvisnosti od velikosti spinske verige N .

2.2 Spinske korelacije

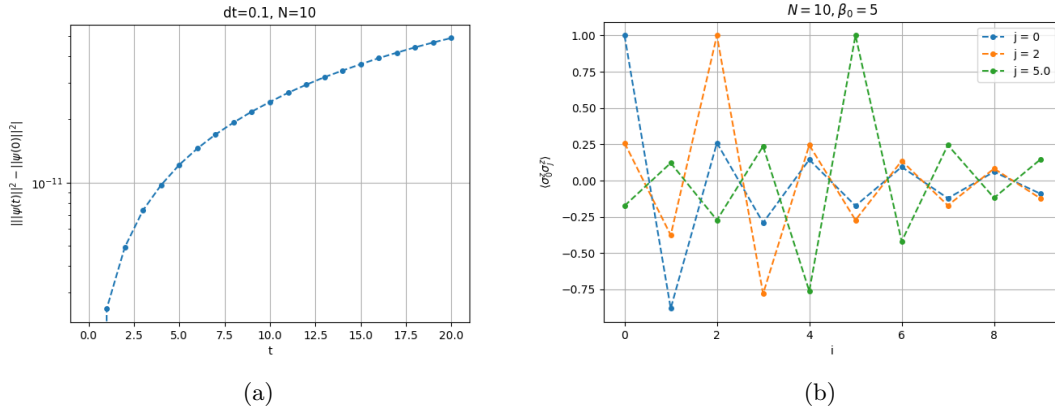
Zanima nas spin-spin korelacijska funkcija v osnovnem stanju $\langle \sigma_j^z \sigma_k^z \rangle$. Izračunamo jo s pomočjo enačbe 24

$$\langle \phi | \sigma_j^z \sigma_k^z | \psi \rangle = L T^{(2)} \dots T^{(j-1)} \tilde{V}^{(j)} T^{(j+1)} \dots T^{(k-1)} \tilde{V}^{(k)} T^{(k+1)} \dots T^{(n-1)} R, \quad (26)$$

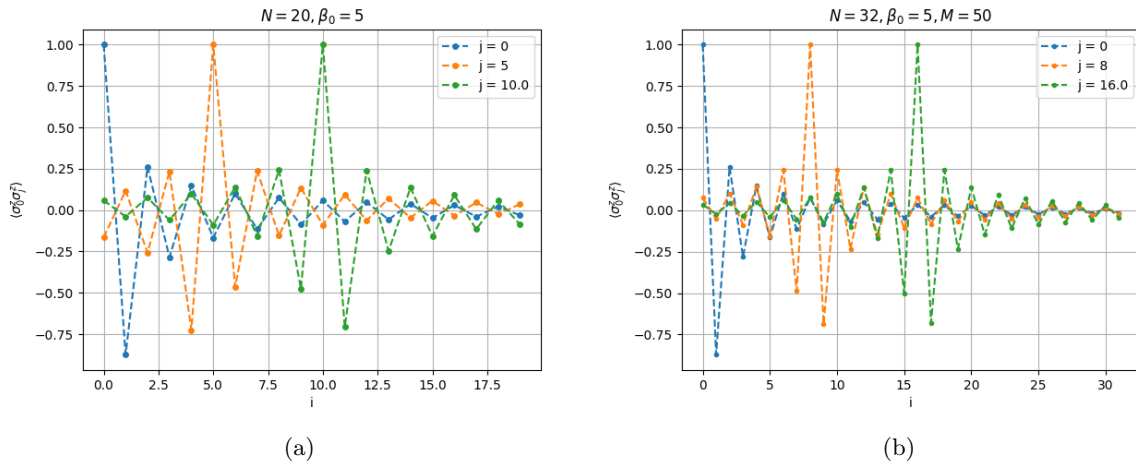
kjer je sedaj

$$\tilde{V}^{(j)} = \tilde{A}_0^{(j)} \otimes A_0^{(j)} - \tilde{A}_1^{(j)} \otimes A_1^{(j)}. \quad (27)$$

Ker bom gledal tudi korelacije v časovni domeni in ne samo v krajevni, sem najprej pogledal ohranjanje norme algoritma TEBD. Vzel sem normirano stanje (vektor koeficientov) ga pretvoril v MPS propagiral v času ter nato spet pretvoril v vektor koeficientov. Rezultat prikazuje slika (3a). Spin-spin korelacije dobim po zgornji enačbi, vendar je najprej potrebno propagirati naključno stanje v imaginarnem času, da pridemo do osnovnega stanja. Oznaka $\langle \sigma_j^z \sigma_k^z \rangle = \langle E_0 | \sigma_j^z \sigma_k^z | E_0 \rangle$, kjer je $|E_0\rangle$ osnovno stanje. Korelacije za različne velikosti spinov prikazujejo slike (3a), (4), (5).



Slika 3: a) Razlika norm valovnih funkcij v odvisnosti od časa. b) Spin-spin korelacija v odvisnosti od mesta v verigi.



Slika 4: Spin-spin korelacija v odvisnosti od mesta v verigi.

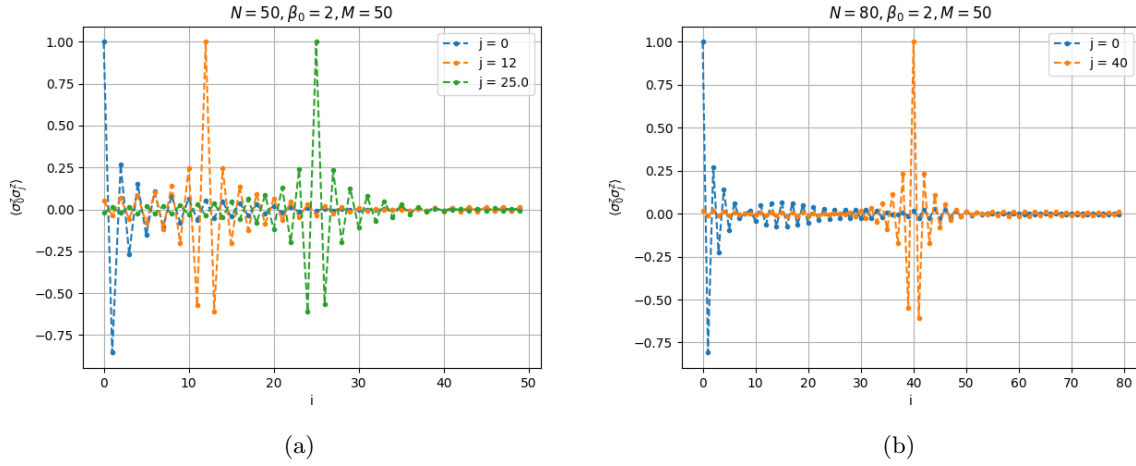
Dovolj je izračunati korelacije za polovico verige, saj se odvisnosti zrcali preko sredine verige spinov. Korelacija spreminja predznak na sosednjih mestih verige, kar je tudi smiselno, saj imamo opravka z antiferomagnetom. Velja tudi simetrija $\langle \sigma_j^z \sigma_k^z \rangle = \langle \sigma_k^z \sigma_j^z \rangle$. Presenetljive so oscilacije korelacijske funkcije na sliki (5b). Nisem ravno prepričan ali je to posledica premajhnega števila M ali česa drugega. Da bi raziskal vzrok, bi moral (za večje sisteme, $N \approx 100$) implementirati algoritem, ki hitreje naredi skalarni produkt med dvema MPS stanjema, saj je bil že račun za $N = 80$ časovno precej zahteven.

Pogledal sem si tudi spin-spin korelacije v časovni domeni. Za časovni korak sem vzel $dt = 0.1$. Iz naloge 4.

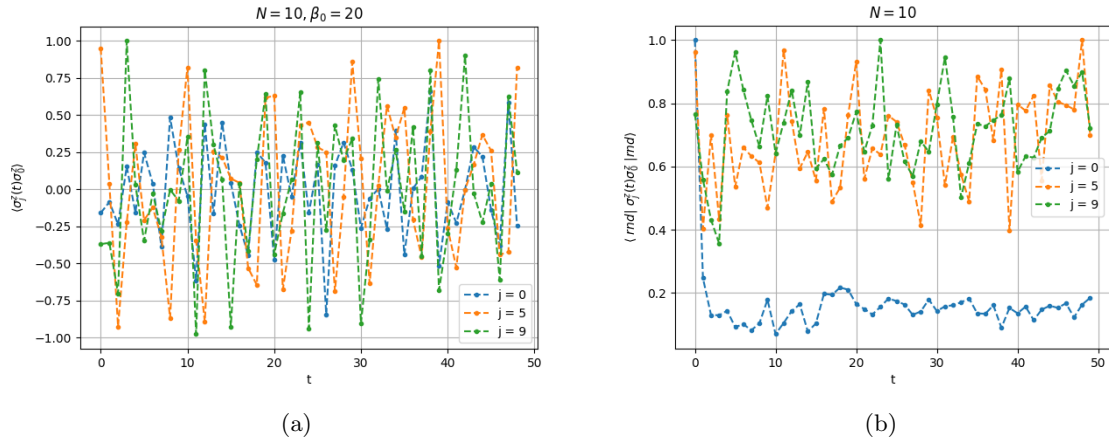
vemo približno kakšna mora biti časovna odvisnost avtokorelacijske funkcije. Tam smo računali avtokorelacijsko funkcijo pri visokih temperaturah, kar implicira tudi na veliko entropijo sistema. Avtokorelacijska funkcija pri manjših sistemih ni limitirala proti nič, pri večjih pa je. Računal sem časovne korelacije na osnovnem stanju

$$\langle \sigma_j^z(t) \sigma_k^z \rangle = \langle E_0(t) | \sigma_j^z(0) e^{-iHt} \sigma_k^z(0) | E_0 \rangle = \langle E_0(t) | \sigma_j^z(0) | \chi(t) \rangle, \quad (28)$$

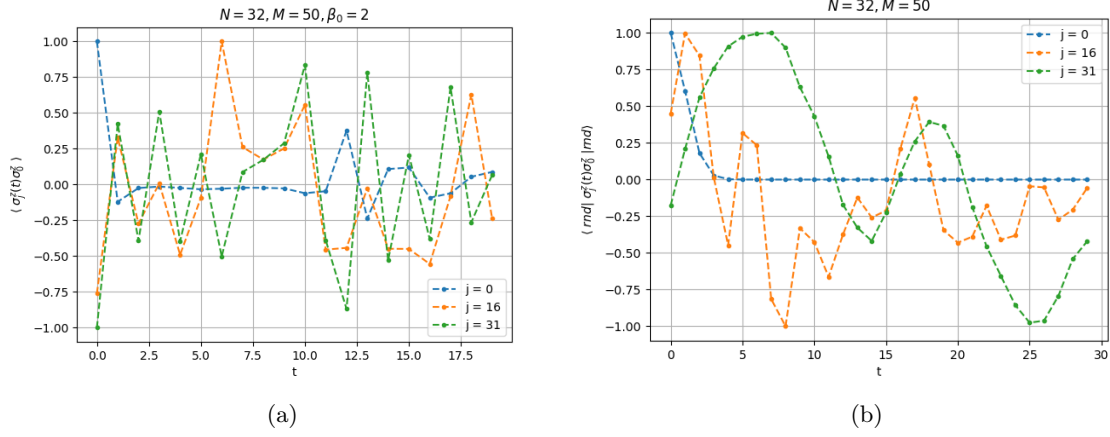
in tudi na naključnem stanju $\langle rnd | \sigma_j^z(t) \sigma_k^z | rnd \rangle$. Naključno stanje predstavlja maksimalno entropijo, kar lahko tudi implicira na visoke temperature, torej bi lahko pričakoval podobno obnašanje avtokorelacijske funkcije kot v nalogi 4. Časovne korelacije za 10 in 32 spinov v osnovnem in naključnem stanju prikazujejo slike (5), (6). Ko je začetno stanje osnovno stanje spinske verige, korelacije ne pojemajo v danem časovnem intervalu. V primeru, ko je začetno stanje naključno stanje, je avtokorelacija precej podobna tisti iz 4. naloge, pri večjem številu spinov gre proti nič, pri manjšem pa oscilira okrog nekega povprečja.



Slika 5: Spin-spin korelacija v odvisnosti od mesta v verigi.



Slika 6: Časovna korelacijska funkcija spinov 0 in j , kjer je začetno stanje osnovno stanje verige.



Slika 7: Časovna korelacijska funkcija spinov 0 in j , kjer je začetno stanje osnovno stanje verige.

2.3 Feromagnetna domenska stena

Zanima nas časovni razvoj domenske stene feromagnetne Heisenbergove verige spinov. Hamiltonian je sedaj

$$H_{FM} = - \sum_1^N \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} . \quad (29)$$

Dvodelčni operator

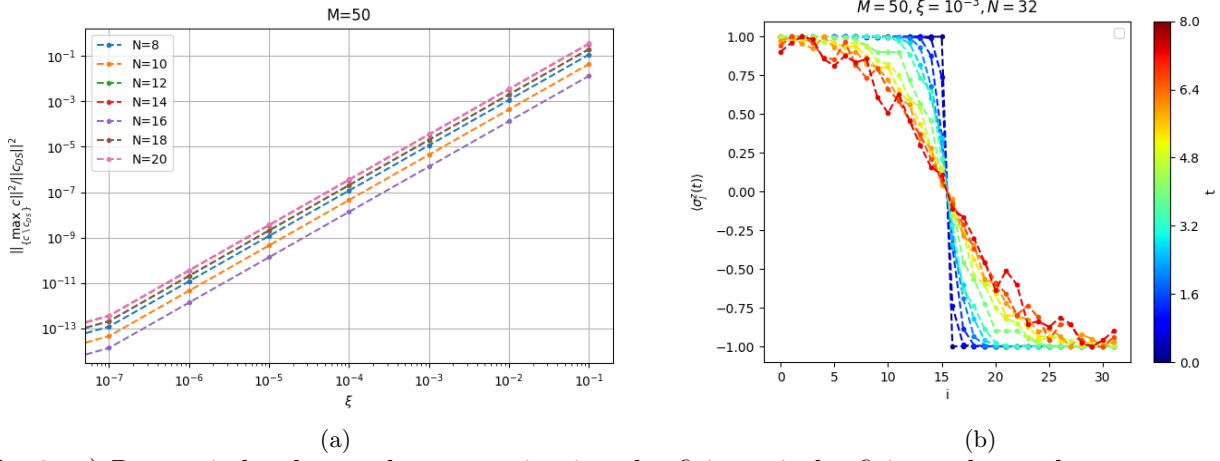
$$U_{j,j+1}(z) = e^{z \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1}} , \quad (30)$$

se spremeni v

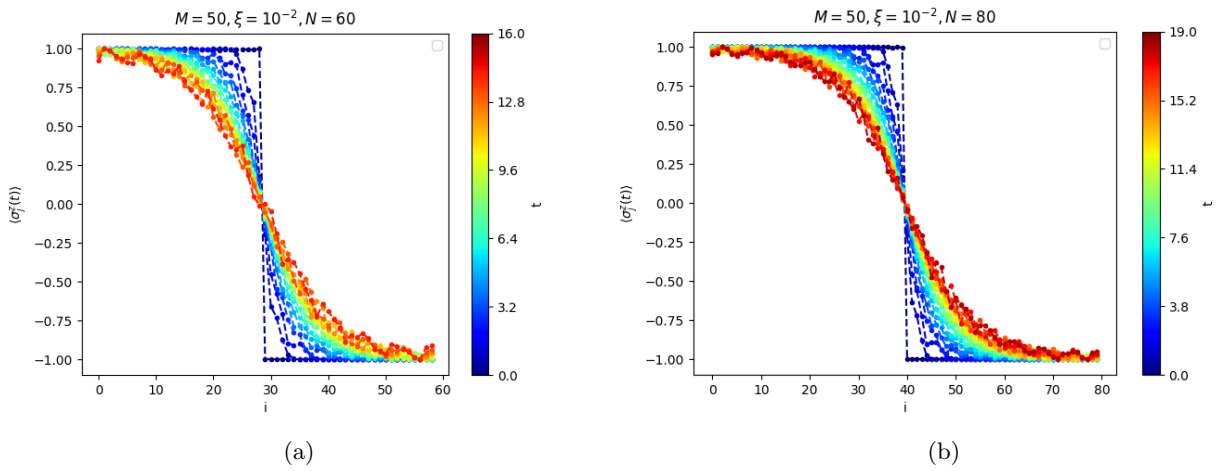
$$U_{j,j+1}(-z) = e^{-z \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1}} . \quad (31)$$

Uporabim lahko isto kodo, samo spremeniti je potrebno predznak v propagatorju. Začetno stanje domenske stene je tako, da polovica zaporednih spinov kaže gor in polovica dol. To stanje je potrebno predstaviti v MPS obliki. Podatke o spinu na j -tem mestu sem v matriki $B_{s_j}^{(j)}$ (ali $A_{s_j}^{(j)}$) hranil tako, da so sode vrstice matrike predstavljale spin 0 (gor) in lihe vrstice matrike spin 1 (dol). Če želim narediti začetno stanje domenske stene (npr. 10 spinov: 0000011111), potem ima prva polovica matrik $B_{(s_j, k_{j-1}), k_j}^{(j)}$ lihe vrstice 0 in druga polovica matrik sode vrstice 0. Na ta način ob zmnožku matrik dobim koeficient, ki zastopa začetno stanje domenske stene. Težava nastane pri propagaciji takega stanja. Na začetku je na vsakem koraku polovica lastnih vrednosti 0, in rank po SVD razcepu je vedno manjši od ranka pred razcepom na tistem mestu, kar pomeni da na vsakem koraku krčimo sistem, in če ga ne pa nastane težava zaradi deljenja z 0. Težavo sem rešil tako, da sem generiral naključno MPS stanje in potem lihe ali sode vrstice, odvisno od stanja ki sem ga želel, pomnožil s faktorjem $\xi \ll 1$. Ker koeficient dobimo iz množenja matrik, bodo koeficienti, vsi razen željenega, vsaj za faktor ξ manjši (večina bo manjših za nekaj velikostnih redov). Če je ξ prevelik potem ne bom dobro predstavil stanja domenske stene, če je premajhen pa pride do veliko rezanja matrik in posledično slabše natančnosti. Želim čim večji ξ in posledično MPS, ki še vedno dovolj dobro opiše stanje domenske stene. V ta namen sem pogledal razmerje med kvadratom koeficienta (verjetnost za stanje), ki je naslednji največji za domenskim stanjem in kvadratom koeficienta, ki predstavlja domensko stanje (slika 8a). Iz odvisnosti je razvidno, da že pri $\xi \approx 10^{-2}$ je verjetnost, da je sistem v drugem najbolj verjetnem stanju približno tisočkrat manjša od verjetnosti, da je v stanju domenske stene. Večina ostalih stanj je za več velikostnih redov manjših. V večini primerov sem vzel kar $\xi = 10^{-2}$, saj mislim da sem dobil zadovoljive rezultate. V obliki MPS stanja lahko ustvarim poljubno domensko konfiguracijo (več domenskih sten, različnih velikosti) in potem z algoritmom TEBD spremljam časovni razvoj ($z = it$). Za časovni korak sem vzel $dt = 0.1$. Maksimalna velikost matrik $M = 50$ se je izkazala za dovolj dobro.

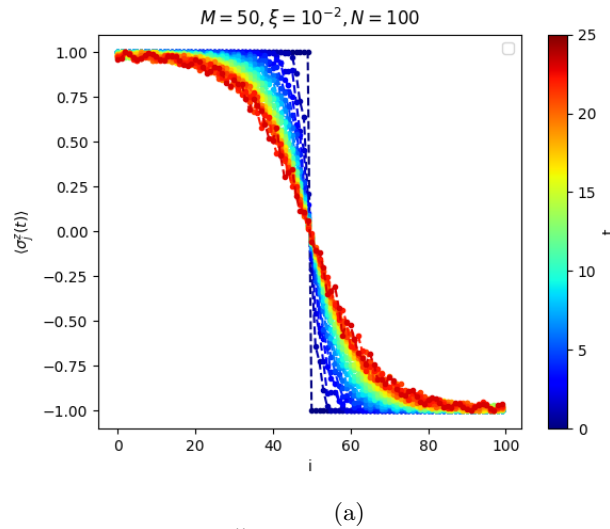
Najprej sem pogledal časovni razvoj za 1 domensko steno in enakim številom spinov gor in dol (slike (8b),(9), (10)). V nekaterih primerih sem propagiral toliko časa, da je domenska stena dosegla rob verige in posledično vidimo efekt roba verige. Z večanjem verige oz. števila spinov se večja tudi čas, ki je potreben da se motnja razširi do roba verige. Domenska stena se začne s časom širiti oz. gladiti.



Slika 8: a) Razmerje kvadratov drugega največjega koeficienta in koeficienta domenske stene v odvisnosti od parametra ξ . b) Časovni razvoj domenske stene.

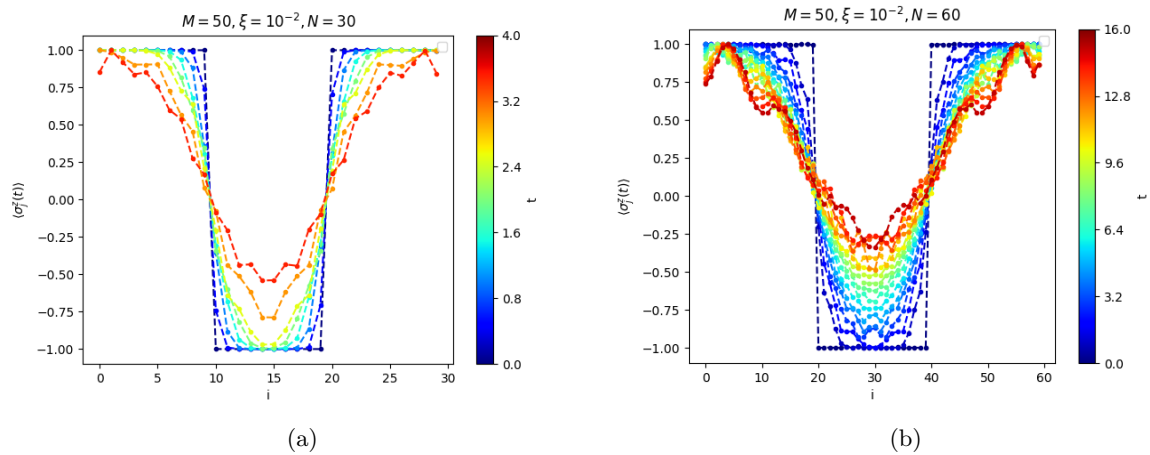


Slika 9: Časovni razvoj domenske stene.



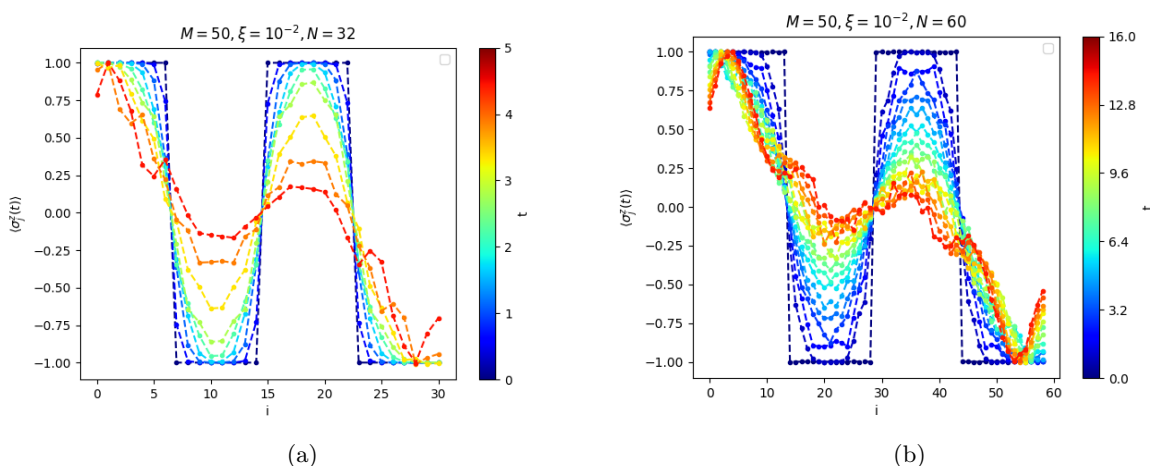
Slika 10: a) Časovni razvoj domenske stene.

V primeru dveh domenskih sten (slika 11), kjer je del spinov navzdol, se bi po dolgem času del spinov navzdol obrnil navzgor in bi dobili feromagnetno stanje. Bi pa potreboval daljšo verigo, oziroma bi moral zmanjšati število spinov, ki so obrnjeni navzdol, da bi to potrdil. Po daljšem času ($t \approx 15$, slika 11b) se opazi efekt robov.

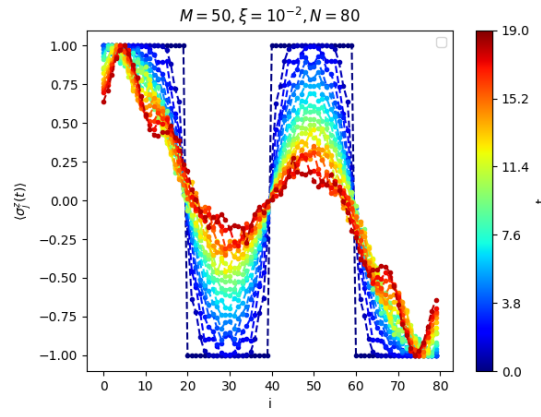


Slika 11: Časovni razvoj dveh domenskih sten.

V primeru 3 domenskih sten, med katerimi je enako število spinov (slika 12,13) se magnetizacija v vmesnih območjih z narobe obrnjenim spinom začne manjšati in čez čas bi dobili profil podoben 1 domenski steni. V primeru ko imamo različno število spinov med domenskimi stenami (slika 14) pa se profil nekoliko spremeni. V primeru (14b) je sredinskih območjih manj spinov kot na robu, kar pomeni da bomo "kasneje" dosegli rob stene. Ker sta območji enako veliki je profil simetričen glede na središče verige. Po daljšem času dobimo profil razširjene 1 domenske stene. V primeru (14a) se del, kjer je 5 spinov navzgor obrnjenih, hitreje obrača kot del 10 spinov navzdol obrnjenih in profil ni več simetričen glede na središče verige.

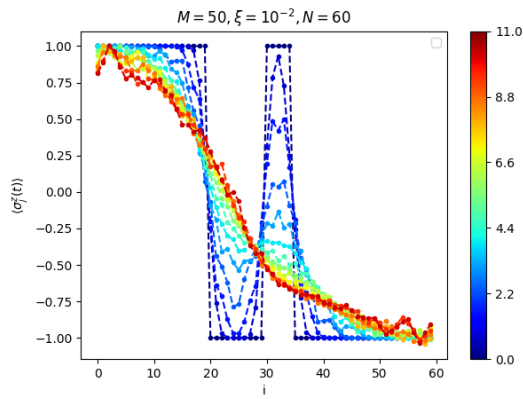


Slika 12: Časovni razvoj 3 domenskih sten.

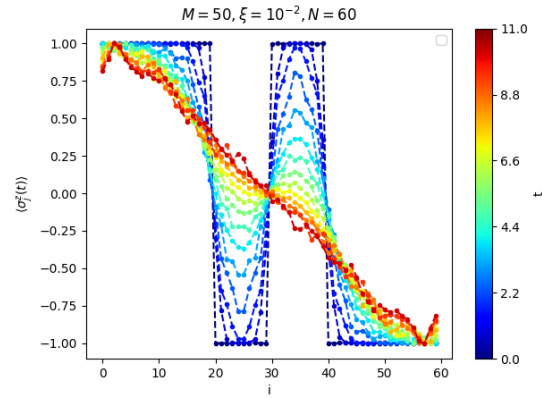


(a)

Slika 13: Časovni razvoj 3 domenskih sten.



(a)



(b)

Slika 14: a) Časovni razvoj 3 domenskih sten, kjer je na robovih enako število spinov in v notranjosti verige 10 spinov navzdol in 5 navzgor. b) Časovni razvoj 3 domenskih sten, kjer je na robovih enako število spinov in večje od števila spinov na notranjih območjih.

3 Zaključek

Z matrično-produktnimi nastavki lahko prostorsko učinkovito predstavimo mnogodelčno stanje v računalniku za spinske verige dolžine ≈ 100 . V kombinaciji z TEBD algoritmom lahko učinkovito generiramo termalna ravnovesna stanja, simuliramo krajše časovne razvoje sistemov in računamo korelacijske funkcije.